

08

## Формирование высококачественных релаксированных SiGe-слоев с большой долей Ge методом молекулярно-пучковой эпитаксии

© Д.В. Юрасов<sup>1</sup>, И.С. Белоконь<sup>1,2</sup>, М.В. Шалеев<sup>1</sup>, П.А. Юнин<sup>1</sup>, А.В. Новиков<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup> Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: Inquisitor@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 27 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 29 мая 2026 г.

Принято к публикации 31 мая 2026 г.

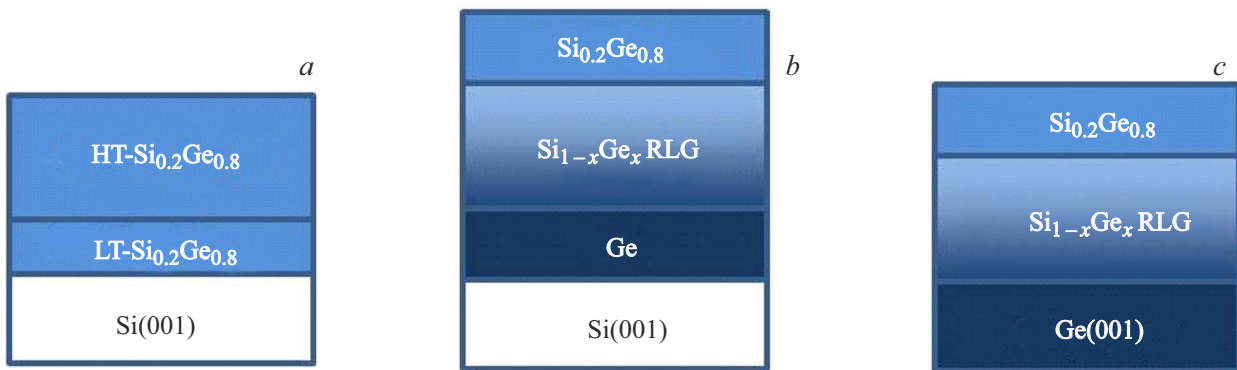
Проведено сравнительное исследование кристаллического качества релаксированных буферных слоев SiGe с высокой (~ 80%) долей Ge, сформированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии с использованием различных подходов. Показано, что минимальной шероховатостью поверхности, а также наименьшей плотностью прорастающих дефектов (~  $10^6 \text{ cm}^{-2}$  при росте на подложках Ge(001) и ~  $7 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$  при росте на подложках Si(001)) обладают слои SiGe, полученные методом обратного градиента. Такие слои могут быть использованы как виртуальные подложки для роста структур с напряженными квантовыми ямами Ge для реализации кубитов на основе манипуляции спином дырок.

**Ключевые слова:** SiGe-гетероструктуры, молекулярно-пучковая эпитаксия, шероховатость поверхности, прорастающие дислокации, кубит.

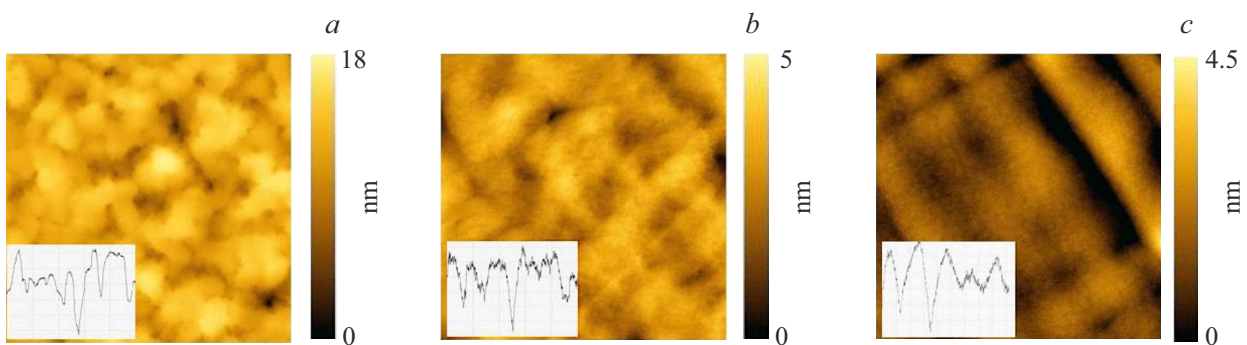
DOI: 10.61011/PJTF.2026.17.63479.20747

В настоящее время исследуются различные материальные системы для создания универсального квантового компьютера, способного решать практические задачи. Полупроводниковая платформа хотя и уступает на текущий момент другим (на основе сверхпроводников, ионов, нейтральных атомов), но обладает ключевым преимуществом по потенциалу масштабирования. В первую очередь это относится к спиновым кубитам на основе структур Si/Ge, для которых уже была продемонстрирована возможность получения в промышленных масштабах [1]. В структурах SiGe для реализации кубитов возможно использование спинов как электронов, так и дырок. Одним из основных преимуществ „дырочных“ кубитов (на основе манипуляции спином дырок) по сравнению с „электронными“ кубитами является возможность управления спином дырок с помощью исключительно электрических сигналов и проведения операций с кубитом на высокой частоте. Данная возможность обусловлена гораздо более сильным спин-орбитальным взаимодействием в структурах SiGe для дырок, чем для электронов [2,3]. Одним из вариантов структур для реализации „дырочных“ кубитов являются структуры с Ge напряженными квантовыми ямами (КЯ), в которых посредством системы управляющих затворов создаются так называемые „электростатические квантовые точки“, пространственно локализуя дырки во всех трех направлениях. Манипуляции со спином дырок, локализованных в них, и реализуют необходимые для квантовых вычислений одно- и двухкубитные операции [2,3]. Сложность изготовления подобных структур на Si связана с тем, что для их формирования необходимы так называемые виртуальные подложки на

основе релаксированных буферных слоев SiGe с высокой (80–85%) долей Ge [4]. Широко используемый для решения этой проблемы подход на основе переходных слоев SiGe с градиентным нарастанием доли Ge в них со скоростью  $\leq 10\%/\mu\text{m}$ , хорошо зарекомендовавший себя при формировании буферных слоев с относительно небольшой (до 30%) долей Ge, не подходит для буферов с долей Ge > 50% [5]. Это обусловлено тем, что увеличение доли Ge до требуемых значений в 80–85% приводит к развитию значительной шероховатости поверхности и росту концентрации прорастающих дефектов [5]. Кроме того, толщина такого градиентного буфера должна составлять величину порядка десятка микрон. В литературе были предложены два альтернативных подхода для получения слоев Ge либо слоев SiGe с большой долей Ge: подход, использующий двухтемпературный режим роста [6], и подход на основе обратного градиента [7,8]. При этом для изготовления таких SiGe-буферов используются различные методы, что свидетельствует об отсутствии общепринятого оптимального способа их формирования. В большинстве работ использовались методы газофазной эпитаксии как более промышленно-ориентированные. Однако метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) может иметь определенные преимущества из-за возможностей проведения ростового процесса при различных, в том числе пониженных, температурах и получения более резких интерфейсов на границах КЯ. Отметим, что релаксация растягивающих напряжений при росте на поверхности (001) как Ge, так и Si затруднена и сопровождается ростом шероховатости поверхности. Основной причиной различий пластической релаксации упругих напряжений



**Рис. 1.** Схема исследуемых структур. *a* — двухтемпературный метод с последующим отжигом, *b* — метод обратного градиента на подложке Si(001), *c* — то же, что и на части *b*, но на подложке Ge(001).



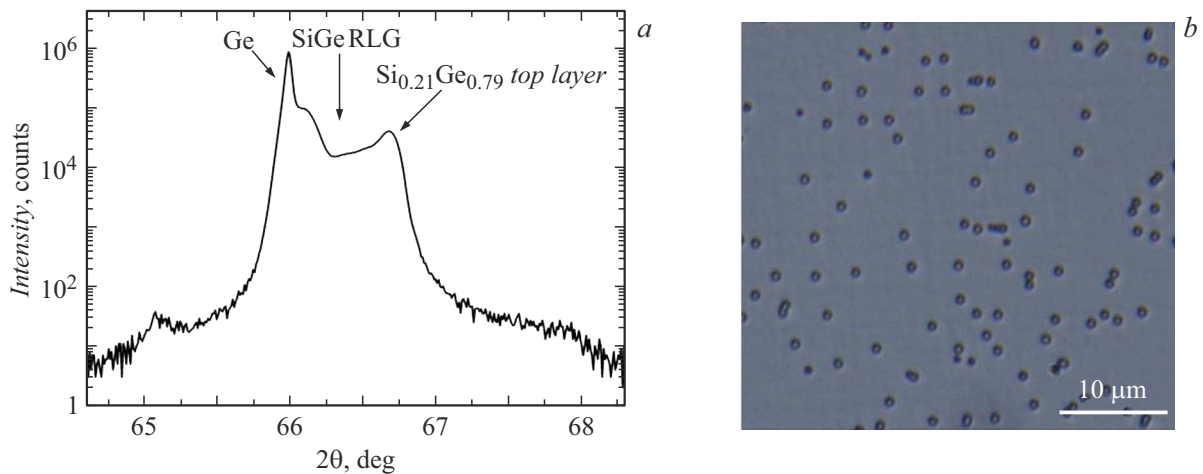
**Рис. 2.** АСМ-снимки релаксированных буферных слоев SiGe, полученных двухтемпературным методом с последующим отжигом (*a*) и методом обратного градиента на подложках Si(001) (*b*) и Ge(001) (*c*). Размер снимков  $8 \times 8 \mu\text{m}$ . На вставках показан профиль высот по направлению  $\{110\}$ , на частях *b* и *c* наблюдается пространственная периодичность изменений высоты, связываемая со следами так называемого „cross-hatch pattern“, что характерно для градиентных релаксированных слоев SiGe.

в растянутых и сжатых слоях, выращенных на подложках со структурой алмаза с ориентацией (001), является зависимость механизма скольжения  $60^\circ$  дислокаций от знака деформации [9]. При релаксации деформаций растяжения (в отличие от сжатия) возможно возникновение дефектов упаковки, которые приводят к росту шероховатости поверхности [10]. В настоящей работе методом МПЭ с использованием различных подходов на подложках Si(001) и Ge(001) были выращены релаксированные слои SiGe с высокой долей Ge и проведен сравнительный анализ их кристаллического качества.

Рост производился на установке МПЭ Riber SIVA-21. Схема исследуемых структур представлена на рис. 1. Для выращивания слоев были использованы метод двухтемпературного роста („LT-HT“) с последующим высокотемпературным отжигом (рис. 1, *a*) (широко применяемый для роста слоев Ge на Si(001) [11,12]) и метод обратного градиента (reverse linear grading, RLG) (рис. 1, *b, c*) [7,8]. Рост выполнялся как на подложках Si(001), так и на подложках Ge(001), так как при использовании последних рассогласование кристаллических решеток финального SiGe-слоя с подложкой существенно меньше. Это позволяет ожидать меньшую плотность порастающих дефектов и, как следствие, большую

подвижность носителей в КЯ и меньший уровень шумов, негативно влияющих на рабочие характеристики спиновых кубитов [13,14].

Для двухтемпературного метода условия роста были аналогичны приведенным в [12]. После роста проводился циклический отжиг в вакууме (пять циклов отжига при  $T_1 = 850^\circ\text{C}$ , 2 min/ $T_2 = 550^\circ\text{C}$ , 2 min). Для метода обратного градиента в случае роста на Si-подложке сначала формировался Ge-слой толщиной  $1 \mu\text{m}$  с последующим отжигом (аналогично двухтемпературному методу), затем выращивался градиентный SiGe-слой толщиной  $\sim 2 \mu\text{m}$  с линейным нарастанием доли Si до 20%, поверх которого выращивался слой  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$  постоянного состава толщиной  $0.5 \mu\text{m}$ . Температура роста SiGe-слоев была  $\sim 500^\circ\text{C}$ , что ниже типичных температур роста буферов с обратным градиентом при использовании газофазной эпитаксии [7,8]. Выбор более низкой температуры роста обусловлен тем, что, как показали проведенные исследования, использование более высоких ( $T = 700\text{--}750^\circ\text{C}$ ) температур при росте SiGe-слоя с обратным градиентом методом МПЭ приводит к развитию высокой шероховатости поверхности. При использовании подложек Ge(001) сначала выращивался Ge-слой толщиной  $100 \text{ nm}$ , за которым



**Рис. 3.** *a* — РД-скан, на котором видна Ge-подложка, SiGe RLG-буфер и верхний слой SiGe с  $X_{\text{Ge}} = 79\%$ . *b* — оптическая микрофотография одной из структур после селективного травления дефектов.

осаждались градиентный SiGe-слой и слой  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$  при тех же условиях, что и для роста на Si(001). Скорости осаждения составляли 0.1–0.125 nm/s. Для части структур, выращенных методом обратного градиента, также проводился постростовой отжиг при  $T = 700$  и  $750^\circ\text{C}$  длительностью 5–30 min. Кристаллическое совершенство структур тестировалось с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ), рентгеновской дифракции (РД) и селективного травления дефектов.

Результаты АСМ-исследований приведены на рис. 2. Шероховатость поверхности слоя  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ , выращенного двухтемпературным методом, оказалась в несколько раз выше (среднеквадратичная шероховатость (RMS)  $\sim 2$  nm, перепад высот  $\sim 18$  nm), чем для слоев, полученных методом обратного градиента (RMS  $\sim 0.6$  nm, перепад высот  $\sim 5$  nm). При этом шероховатость поверхности слоев  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$  практически не зависела от типа используемой подложки. Отметим, что шероховатость слоя  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ , выращенного двухтемпературным методом, оказалась выше, чем для слоев Ge/Si(001) (RMS  $\sim 1$  nm) [12], что, возможно, связано с неоднородностями состава слоя SiGe, ведущими к увеличению шероховатости при высокотемпературном отжиге. Для структур, выращенных методом обратного градиента и подвергнутых постростовому отжигу, наблюдалось значительное (в 3–5 раз) возрастание шероховатости поверхности, вследствие чего такой отжиг был признан нежелательным. Значения шероховатости для слоев, выращенных в настоящей работе методом обратного градиента (без отжига), оказались заметно ниже, чем в слоях, выращенных методом газофазной эпитаксии (RMS  $\sim 1.5$ –2 nm) [8], и немного ниже, чем в работе [15] (RMS  $\sim 0.95$  nm при температуре роста  $420^\circ\text{C}$ ), в которой также использовалась МПЭ как метод роста. Меньшая шероховатость поверхности полученных в настоящей работе структур может быть связана с более оптимальной температурой осаждения.

Для сравнения кристаллического качества сформированных образцов использовались РД и селективное травление дефектов. РД-исследования позволили восстановить данные по компонентному составу структур. На рис. 3, *a* приведен характерный рентгеновский спектр образца, выращенного методом обратного градиента на подложке Ge(001), позволяющий четко выделить пики, соответствующие Ge-подложке, SiGe-слою переменного состава и итоговому SiGe-слою постоянного состава. Согласно РД-анализу, полученные слои полностью релаксированы и доля Ge в верхнем слое составляет 79%, что очень близко к номинально задаваемым параметрам. Плотность прорастающих дислокаций (threading dislocation density, TDD) оценивалась подсчетом ямок травления в оптическом микроскопе. В качестве травителя использовался состав  $\text{HNO}_3(20 \text{ ml}):\text{CH}_3\text{COOH}(45 \text{ ml}):\text{HF}(10 \text{ ml}):\text{I}_2(60 \text{ mg}):\text{H}_2\text{O}(75 \text{ ml})$ , который позволил обеспечить хорошую визуализацию ямок травления при удалении 200–300 nm верхнего слоя  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ . Типичный снимок поверхности SiGe RLG-буфера после травления, полученный с помощью оптического микроскопа, приведен на рис. 3, *b*. Исследование наборов из нескольких снимков различных областей каждого образца позволило оценить среднюю TDD для исследуемых структур. Было выявлено, что для структуры, выращенной двухтемпературным методом, плотность прорастающих дислокаций составляет  $\text{TDD} \sim (1.5 \pm 0.4) \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ , что близко к результатам, полученным авторами для слоев Ge/Si(001) [12], несмотря на меньшее рассогласование параметров решеток слоя  $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$  и подложки, что также может быть связано с неоднородностями состава и появлением дополнительных дефектов. Для структур, полученных методом обратного градиента,  $\text{TDD} \sim (7 \pm 0.8) \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$  в случае образцов, выращенных на подложке Si(001), и  $\text{TDD} \sim (1 \pm 0.3) \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$  в случае образцов, выращенных на подложке Ge(001).

Эти уровни TDD сравнимы с полученными другими исследовательскими группами [8,13,14], что в совокупности с более низкой шероховатостью поверхности (см. выше) позволяет считать описанную выше технологию изготовления SiGe-буферов с большой долей Ge методом МПЭ пригодной для формирования на них структур с Ge КЯ. Возможности реализации неравновесного режима роста в методе МПЭ могут быть использованы для получения более резких интерфейсов в КЯ. Кроме того, полученные результаты могут быть использованы для формирования структур с различным изотопным обогащением для реализации кубитов, в которых толстые буферные слои SiGe будут получены из природных источников Si и Ge, а активная (тонкая) область — Ge КЯ и окружающие ее SiGe-барьеры — из изотопно-обогащенных Ge и Si источников с низкой концентрацией изотопов  $^{73}\text{Ge}$  и  $^{29}\text{Si}$  с ненулевым ядерным спином [16].

Таким образом, в работе было проведено прямое сравнение различных методов получения виртуальных подложек SiGe с долей Ge  $\sim 80\%$  на подложках Si(001) и Ge(001) методом МПЭ. Было показано, что наименьшие плотности прорастающих дефектов и величины шероховатости поверхности достигаются при использовании метода обратного градиента. Полученные уровни дефектности и шероховатости поверхности сравнимы с лучшими опубликованными результатами, что свидетельствует о перспективности предложенного способа изготовления виртуальных подложек SiGe методом МПЭ для формирования на них структур для „дырочных“ спиновых кубитов.

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках госзадания ИФМ РАН (FFUF-2024-0019).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] T. Koch, C. Godfrin, V. Adam, J. Ferrero, D. Schroller, N. Glaeser, S. Kubicek, R. Li, R. Loo, S. Massar, G. Simion, D. Wan, K. De Greve, W. Wernsdorfer, npj Quantum Inf., **11**, 59 (2025). DOI: 10.1038/s41534-025-01016-x
- [2] N.W. Hendrickx, D.P. Franke, A. Sammak, G. Scappucci, M. Veldhorst, Nature, **577**, 487 (2025). DOI: 10.1038/s41586-019-1919-3
- [3] G. Scappucci, C. Kloeffel, F.A. Zwanenburg, D. Loss, M. Myronov, J.-J. Zhang, S. De Franceschi, G. Katsaros, M. Veldhorst, Nat. Rev. Mater., **6**, 926 (2021). DOI: 10.1038/s41578-020-00262-z
- [4] W.L.L. Lawrie, H.G.J. Eenink, N.W. Hendrickx, J.M. Boter, L. Petit, S.V. Amitonov, M. Lodari, B. Paquelet Wuetz, C. Volk, S.G.J. Philips, G. Droulers, N. Kalhor, F. van Riggelen, D. Brousse, A. Sammak, L.M.K. Vandersypen, G. Scappucci, M. Veldhorst, Appl. Phys. Lett., **116**, 080501 (2020). DOI: 10.1063/5.0002013
- [5] S.B. Samavedam, E.A. Fitzgerald, J. Appl. Phys., **81**, 3108 (1997). DOI: 10.1063/1.364345
- [6] H.-C. Luan, D.R. Lim, K.K. Lee, K.M. Chen, J.G. Sandland, K. Wada, L.C. Kimerling, Appl. Phys. Lett., **75**, 2909 (1999). DOI: 10.1063/1.125187
- [7] V.A. Shah, A. Dobbie, M. Myronov, D.J.F. Fulgoni, L.J. Nash, D.R. Leadley, Appl. Phys. Lett., **93**, 192103 (2008). DOI: 10.1063/1.3023068
- [8] V.A. Shah, A. Dobbie, M. Myronov, D.R. Leadley, J. Appl. Phys., **107**, 064304 (2010). DOI: 10.1063/1.3311556
- [9] E.P. Kvam, R. Hull, J. Appl. Phys., **73**, 7407 (1993). DOI: 10.1063/1.354033
- [10] J.E. Van Nostrand, D.G. Cahill, I. Petrov, J.E. Greene, J. Appl. Phys., **83**, 1096 (1998). DOI: 10.1063/1.366799
- [11] J.M. Hartmann, A. Abbadie, J.P. Barnes, J.M. Fedeli, T. Billon, L. Vivien, J. Cryst. Growth, **312**, 532 (2010). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2009.11.056
- [12] Д.В. Юрасов, А.И. Бобров, В.М. Данильцев, А.В. Новиков, Д.А. Павлов, Е.В. Скороходов, М.В. Шалеев, П.А. Юнин, ФТП, **49** (11), 1463 (2015). <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/42444> [D.V. Yurasov, A.I. Bobrov, V.M. Daniilteev, A.V. Novikov, D.A. Pavlov, E.V. Skorokhodov, M.V. Shaleev, P.A. Yunin, Semiconductors, **49** (11), 1415 (2015). DOI: 10.1134/S1063782615110263].
- [13] L.E.A. Stehouwer, A. Tosato, D.D. Esposti, D. Costa, M. Veldhorst, A. Sammak, G. Scappucci, Appl. Phys. Lett., **123**, 092101 (2023). DOI: 10.1063/5.0158262
- [14] L.E.A. Stehouwer, C.X. Yu, B. van Straaten, A. Tosato, V. John, D.D. Esposti, A. Elsayed, D. Costa, S.D. Oosterhout, N.W. Hendrickx, M. Veldhorst, F. Borsoi, G. Scappucci, Nat. Mater., **24**, 1906 (2025). DOI: 10.1038/s41563-025-02276-w
- [15] J.-Y. Zhang, M. Ming, J.-H. Wang, D.-M. Huang, H. Gao, Y.-X. Chu, B.-X. Fu, H.Q. Xu, J.-J. Zhang, Appl. Phys. Lett., **125**, 122106 (2024). DOI: 10.1063/5.0210639
- [16] Д.В. Юрасов, А.В. Новиков, М.В. Шалеев, М.Н. Дроздов, Е.В. Демидов, А.В. Антонов, Л.В. Красильникова, Д.А. Шмырин, П.А. Юнин, З.Ф. Красильник, С.В. Ситников, Д.В. Щеглов, Письма в ЖТФ, **50** (10), 22 (2024). DOI: 10.61011/PJTf.2024.10.57767.19813 [D.V. Yurasov, A.V. Novikov, M.V. Shaleev, M.N. Drozdov, E.V. Demidov, A.V. Antonov, L.V. Krasilnikova, D.A. Shmyrin, P.A. Yunin, Z.F. Krasilnik, S.V. Sitnikov, D.V. Sheglov, Tech. Phys. Lett., **50** (5), 56 (2024). DOI: 10.61011/TPL.2024.05.58424.19813].